<u>Лекция 4.</u>

Взаимодействующий электронный газ. Обменное взаимодействие. Оператор электрон-электронного взаимодействия. Структура корреляционной энергии. Корреляция в положении электронов. Коррелятор «плотность- плотность». Энергия взаимодействия электронов. Вигнеровский кристалл.

Для оператора энергии электрон-электронного взаимодействия получаем:

$$\hat{V}_{ee} = \frac{1}{2}\sum_{\vec{q}\neq 0}\frac{4\pi e^2}{\Omega q^2}\sum_{\substack{k_1 k_2\\ \sigma_1\sigma_2}} 1\cdot 1\cdot 1\cdot 1\cdot \hat{a}^+_{\vec{k}_1\sigma_1}\hat{a}^+_{\vec{k}_2\sigma_2}\hat{a}_{\vec{k}_2+\vec{q}_1\sigma_2}\hat{a}_{\vec{k}_1-\vec{q}_1\sigma_1}$$

Теперь найдем электрон-электронный вклад в энергию:

$$E_e^{(1)} = \left\langle \{n\}|\hat{V}_{ee}|\{n\}\right\rangle = \frac{1}{2}\sum_{\vec{q}\neq 0}\frac{4\pi e^2}{\Omega q^2}\sum_{\substack{k_1 k_2\\ \sigma_1\sigma_2}}\left\langle \{n\}|\hat{a}^+_{\substack{\vec{k}_1\\ \sigma_1}}\hat{a}^+_{\substack{\vec{k}_2\\ \sigma_2}}\hat{a}_{\substack{\vec{k}_2+\vec{q}\\ \sigma_2}}\hat{a}_{\substack{\vec{k}_1-\vec{q}\\ \sigma_1}}|\{n\}\right\rangle =$$

(**)

Функция $\left|\{n\}\right\rangle$ не должна поменяться; индексы операторов рождения и уничтожения должны совпадать попарно. Имеется две возможности спаривания :

$$(1)\quad \vec{k}_1=\vec{k}_1-\vec{q} \qquad \vec{k}_2=\vec{k}_2+\vec{q} \qquad \to \vec{q}=0$$
$$\sigma_1=\sigma_2 \qquad \sigma_2=\sigma_2$$

Но в нашей сумме $\vec{q}\neq 0$, следовательно, этот способ спаривания дает нулевой вклад (мы учитываем электронейтральность).

$$(2)\quad \vec{k}_1=\vec{k}_2+\vec{q} \qquad \vec{k}_2=\vec{k}_1-\vec{q},$$
$$\sigma_1=\sigma_2 \qquad \sigma_2=\sigma_1$$

Тогда имеем:

$$(**)\quad =\frac{1}{2}\sum_{\vec{q}\neq 0}\frac{4\pi e^2}{\Omega q^2}\sum_{\vec{k}\sigma}\left\langle \{n\}\middle|\hat{a}^{+}_{\substack{\vec{k}\\ \sigma}}\hat{a}^{+}_{\substack{\vec{k}-\vec{q}\\ \sigma}}\hat{a}_{\substack{\vec{k}\\ \sigma}}\hat{a}_{\substack{\vec{k}-\vec{q}\\ \sigma}}\middle|\{n\}\right\rangle=(***)$$

У всех операторов оказались одинаковые спиновые индексы σ (однонаправленные), т.е. $\uparrow\uparrow$ и $\downarrow\downarrow$ $\Rightarrow$ сумма $\sum\limits_{\sigma} \rightarrow 2$.

$$\left\{\hat{a}_i \hat{a}_j^+\right\} = \delta_{ij} \qquad \Rightarrow \qquad \hat{a}^+_{\substack{\vec{k}-\vec{q}\\ \sigma}} \hat{a}_{\substack{\vec{k}\\ \sigma}} = -\hat{a}_{\substack{\vec{k}\\ \sigma}} \hat{a}^+_{\substack{\vec{k}-\vec{q}\\ \sigma}}$$

(***)

$$= -\frac{1}{2}\sum_{\vec{q}\neq 0}\frac{4\pi e^2}{\Omega q^2}\sum_{\vec{k}\sigma}\langle\{n\}|\underbrace{\underbrace{\hat{a}^+_{\vec{k}_1\sigma}\hat{a}_{\vec{k}_1\sigma}}_{\hat{N}_{\vec{k}_1\sigma}}\underbrace{\hat{a}^+_{\substack{\vec{k}-\vec{q}\\ \sigma}}\hat{a}_{\substack{\vec{k}-\vec{q}\\ \sigma}}|\{n\}\rangle}_{\substack{\hat{N}_{\vec{k}-\vec{q},\sigma}|\{n\}\rangle \\ n_{\vec{k}-\vec{q}}|\{n\}\rangle}}}_{\substack{n_{\vec{k}}n_{\vec{k}-\vec{q}}|\{n\}\rangle \\ n_{\vec{k}}n_{\vec{k}-\vec{q}}\langle\{n\}|\{n\}\rangle}} =$$

$$= -\frac{1}{2}\sum_{\vec{q}\neq 0}\frac{4\pi e^2}{\Omega q^2}\sum_{\vec{k}_1\sigma} n_k n_{k-q} = E_e^{(1)} \equiv \left\langle\{n\}|\hat{V}_{ee}|\{n\}\right\rangle$$

Вклад получился отрицательным, хотя взаимодействие – кулоновское (отталкивание одноименных точечных зарядов). Вклад оказался отрицательным, что соответствует притяжению. Этот удивительный на первый взгляд результат объясняется тем , что прямое кулоновское отталкивание полностью компенсировалось за счет электронейтральности. Электроны с различными проекциями спинов

$\uparrow\uparrow$ и $\downarrow\downarrow$ по сравнению с $\uparrow\downarrow$ и $\downarrow\uparrow$ могут находиться на различных расстояниях. Взаимодействие при учете электронейтральности “цепляет” пару с совпадающими спинами , $\Rightarrow$, расстояние между ними больше, чем среднее r_e.

Так как мы считаем все вклады для среднего значения r_e, мы завысили вклад электронов с параллельными спинами $\uparrow\uparrow$ и $\downarrow\downarrow$. Расстояние между такими электронами на самом деле больше , чем среднее,$\Rightarrow$,вклад получился отрицательный (т.е. мы завысили $E_e^{(0)}$, отрицательность $E_e^{(1)}$ это компенсирует).

$$\hat{n}_e(\vec{r}) = \sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\\ \sigma_1}} \frac{e^{i\left(-\vec{k}_1+\vec{k}_2\right)\vec{r}}}{\Omega} \hat{a}^{+}_{\substack{k_1\\ \sigma_1}} \hat{a}_{\substack{k_2\\ \sigma_1}}$$ - оператор плотности электронов.

Рассмотрим коррелятор типа

$$\mathrm{K}(R) \equiv \left\langle \{n\} \middle| \hat{n}_e(\vec{r})\hat{n}_e(\vec{r}+\vec{R}) \middle| \{n\} \right\rangle = \langle \{n\} | \sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\\ \sigma}} \frac{e^{i\left(-\vec{k}_1+\vec{k}_2\right)\vec{r}}}{\Omega} \hat{a}^{+}_{\substack{k_1\\ \sigma_1}} \hat{a}_{\substack{k_2\\ \sigma_1}} \cdot$$

$$\sum_{\substack{\vec{k}_3\vec{k}_4\\ \sigma}} \frac{e^{i\left(-\vec{k}_3+\vec{k}_4\right)\left(\vec{r}+\vec{R}\right)}}{\Omega} \hat{a}^{+}_{\substack{k_3\\ \sigma_2}} \hat{a}_{\substack{k_4\\ \sigma_2}} |\{n\}\rangle =$$

$$= \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\\ \sigma_1}} \sum_{\substack{\vec{k}_3\vec{k}_4\\ \sigma_2}} e^{i\left(-\vec{k}_1+\vec{k}_2\right)\vec{r}} e^{i\left(-\vec{k}_3+\vec{k}_4\right)\left(\vec{r}+\vec{R}\right)} \langle \{n\} | \hat{a}^{+}_{\substack{k_1\\ \sigma_1}} \hat{a}_{\substack{k_2\\ \sigma_1}} \hat{a}^{+}_{\substack{k_3\\ \sigma_2}} \hat{a}_{\substack{k_4\\ \sigma_2}} |\{n\}\rangle =$$

$$(1)\quad \vec{k}_1=\vec{k}_2\ ,\sigma_1=\sigma_1\ ;\vec{k}_3=\vec{k}_4,\ \ \sigma_2=\sigma_2$$

$$(2)\quad \vec{k}_1=\vec{k}_4\ ,\sigma_1=\sigma_2\ ;\vec{k}_2=\vec{k}_3,\ \ \sigma_1=\sigma_2$$ Складываем обе возможности:

$$(***)\quad =\frac{1}{\Omega^2}\sum_{\substack{\vec{k}_1\\ \sigma_1}}\sum_{\substack{\vec{k}_2\\ \sigma_2}}1\cdot 1\langle\{n\}|\underbrace{\hat{a}^+_{\substack{k_1\\ \sigma_1}}\hat{a}_{\substack{k_1\\ \sigma_1}}}_{\hat{N}_{\vec{k}_1\sigma_1}}\underbrace{\hat{a}^+_{\substack{k_3\\ \sigma_2}}\hat{a}_{\substack{k_3\\ \sigma_2}}}_{\hat{N}_{\vec{k}_3\sigma_2}}|\{n\}\rangle+$$

$$\rightarrow n_{k_3}n_{k_1}\langle\{n\}|\{n\}\rangle$$

$$+\frac{1}{\Omega^2}\sum_{\sigma_1}\sum_{\vec{k}_1}\sum_{\vec{k}_2}e^{i\left(-\vec{k}_1+\vec{k}_2\right)\vec{r}}e^{i\left(-\vec{k}_2+\vec{k}_1\right)\left(\vec{r}+\vec{R}\right)}\langle\{n\}|\hat{a}^+_{\substack{k_1\\ \sigma_1}}\hat{a}_{\substack{k_2\\ \sigma_1}}\hat{a}^+_{\substack{k_2\\ \sigma_1}}\hat{a}_{\substack{k_1\\ \sigma_1}}|\{n\}\rangle$$

$$\mathrm{K}(R) = \underbrace{\left(\sum_{\vec{k}_1\sigma_1} n_{k_1}\right)\left(\sum_{\vec{k}_3\sigma_2} n_{k_3}\right)\frac{1}{\Omega^2}}_{\left(\frac{N_e}{\Omega}\right)^2 = n_e^2} +$$

$$+\frac{1}{\Omega^2}\sum_{\sigma}\sum_{\vec{k}_1}\sum_{\vec{k}_2} e^{i\left(-\vec{k}_2+\vec{k}_1\right)\vec{R}} \langle\{n\}| \underbrace{\hat{a}^+_{k_1\sigma}\hat{a}_{k_1\sigma}}_{\hat{N}_{\vec{k}_1\sigma}}\ \underbrace{\hat{a}_{k_2\sigma}\hat{a}^+_{k_2\sigma}}_{1-\hat{N}_{\vec{k}_2\sigma}} |\{n\}\rangle =$$

$$= n_e^2 + \frac{2}{\Omega^2}\sum_{\vec{k}_1}\sum_{\vec{k}_2} n_{k_1}\left(1-n_{k_2}\right)\cdot 1\cdot e^{i\left(-\vec{k}_2+\vec{k}_1\right)\vec{R}} =$$

$$= n_e^2 + \frac{2}{\Omega^2}\left(\sum_{\vec{k}_1} n_{k_1} e^{i\vec{k}_1\vec{R}}\right)\underbrace{\left(\sum_{\vec{k}_2} e^{-i\vec{k}_2\vec{R}}\right)}_{\sim\delta_{\vec{R},0}} - \frac{2}{\Omega^2}\left(\sum_{\vec{k}_1} n_{k_1} e^{i\vec{k}_1\vec{R}}\right)\left(\sum_{\vec{k}_2} n_{k_2} e^{-i\vec{k}_2\vec{R}}\right)$$

Итак, было получено выражение для оператора электрон-электронного взаимодействия.

$$\hat{V}_{ee}=\frac{1}{2}\sum_{\alpha\neq\beta=1}^{N_e}\sum_{\vec{q}\neq0}\frac{4\pi e^2}{\Omega q^2}e^{i\vec{q}\left(\vec{r}_\alpha-\vec{r}_\beta\right)}=\frac{1}{2}\sum_{\substack{\vec{k}_1\vec{k}_2\\ \sigma_1\sigma_2}}\sum_{\vec{q}\neq0}\frac{4\pi e^2}{\Omega q^2}\hat{a}^{+}_{\substack{\vec{k}_1\\ \sigma_1}}\hat{a}^{+}_{\substack{\vec{k}_2\\ \sigma_2}}\hat{a}_{\substack{\vec{k}_2+\vec{q}\\ \sigma_2}}\hat{a}_{\substack{\vec{k}_1-\vec{q}\\ \sigma_1}}$$

Поправка к энергии за счет этого взаимодействия

$$E_e^{(1)}=\left\langle\{n\}\middle|\hat{V}_{ee}\middle|\{n\}\right\rangle=-\frac{1}{2}\sum_{\vec{q}\neq0}\frac{4\pi e^2}{\Omega q^2}\sum_{\vec{k}_1\sigma}n_k n_{k-q}$$

Стартуя с положительной отталкивательной энергии, мы получили отрицательную поправку; остался вклад только от электронов с одинаковыми спинами $\uparrow\uparrow$ и $\downarrow\downarrow$.
Из – за фермиевости системы (за счет принципа Паули) электроны с одинаковыми спинами не могут располагаться также близко , как это возможно для электронов с противоположными спинами $\uparrow\downarrow$.

Электроны, которые располагаются на расстоянии больше, чем при однородном распределении, дают в кинетическую энергию меньший вклад $\Rightarrow$ отрицательная поправка.

Вернемся к исследованию коррелятора «плотность – плотность».

$$K\left(\vec{R}\right)=\left\langle \{n\}\left|\hat{n}_e(\vec{r})\hat{n}_e\left(\vec{r}+\vec{R}\right)\right|\{n\}\right\rangle \underset{(\uparrow\uparrow)(\downarrow\downarrow)}{\simeq} n_e^2+\left(\ldots\right)\delta_{\vec{R}_1 0}-\frac{1}{\Omega}\sum_{\sigma}\sum_{\vec{k}_1,\vec{k}_2} e^{i\left(-\vec{k}_1+\vec{k}_2\right)\vec{R}} n_{k_1} n_{k_2}$$

$\delta_{\vec{R}_1 0}$ возникло от $\sum_{\vec{k}_2} e^{i\vec{k}_2\vec{R}}$; $\sum_{\sigma}$ дает 2.

В силу принципа Паули $\vec{R}=0$ невозможно для электронов с совпадающими спинами; поэтому второе слагаемое можно выбросить;

$$\left(\sum_{\vec{k}_1} e^{i\vec{k}_1\vec{R}} n_{\vec{k}_1}\right)\left(\sum_{\vec{k}_2} e^{i\vec{k}_2\vec{R}} n_{\vec{k}_2}\right)=\left(\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{R}} n_{\vec{k}}\right)^2$$

Так как сумма по всем $\vec{k}_2$, можно заменить $\vec{k}_2 \to -\vec{k}_2$, n_{k_2} зависит только от модуля.

$$\sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\vec{R}} n_{\vec{k}} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} e^{ikR(\cos\theta)} n_k = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 2\pi \int_0^{k_F} dk \cdot k^2 \cdot 1 \cdot \int_{-1}^{1} dx e^{ikRx}$$

($x \equiv \cos\theta$, получаем)

$$= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 2\pi \int_0^{k_F} dk \cdot k^{\cancel{2}} \cdot 1 \frac{2\sin kR}{\cancel{k}R} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \frac{1}{R} \int_0^{k_F} dk \cdot k \cdot \sin kR = \quad (*)$$

Интеграл возьмем по частям: $\int_0^{k_F} k \sin kR dk = -\int_0^{k_F} k \cdot \frac{1}{R} d(\cos kR) =$

$$= \left. \frac{k\cos(kR)}{R} \right|_0^{k_F} + \frac{1}{R} \int_0^{k_F} dk \cdot \cos kR =$$

$$-\frac{k_F \cos k_F R}{R} + \frac{\sin k_F R}{R^2} = \frac{1}{R^2}(\sin k_F R - k_F R \cdot \cos k_F R)$$

$$(*)\quad =\frac{\Omega}{(2\pi)^3}4\pi\frac{1}{R^3}\left[\sin(k_F R)-k_F R\cdot\cos(k_F R)\right]=$$

(перепишем это выражение в безразмерных переменных) :

$$=\frac{3}{2}\underbrace{\left(\frac{2\Omega}{(2\pi)^3}\cdot\frac{4\pi}{3}\cdot k_F^3\right)}_{N_e}\left(\frac{\sin z-z\cos z}{z^3}\right)_{z=k_F R}=\frac{3}{2}N_e\left(\frac{\sin z-z\cos z}{z^3}\right)\Big|_{z=k_F R}$$

В результате корреляционная функция приобретает вид

$$K(\vec{R})\simeq n_e^2-\frac{1}{\Omega^2}\cdot\cancel{2}\cdot\frac{9}{\cancel{4}}N_e^2\left(\frac{\sin z-z\cos z}{z^3}\right)^2$$

С учетом $\dfrac{N_e^2}{\Omega^2} = n_e^2$ получаем

$$\frac{\mathrm{K}\left(\vec{R}\right)}{n_e^2} \simeq 1 - \frac{9}{2}\left(\frac{\sin z - z\cos z}{z^3}\right)^2_{\Big| z = k_F R}$$

Отследим за пространственным поведением этой функции:

1) Рассмотрим поведение на больших расстояниях $R \to \infty \quad \sim \quad k_F R = z \gg 1$

$$\left(\frac{\sin z - z\cos z}{z^3}\right)^2 \leq \frac{1}{z^4} \underset{z\to\infty}{\longrightarrow} 0$$

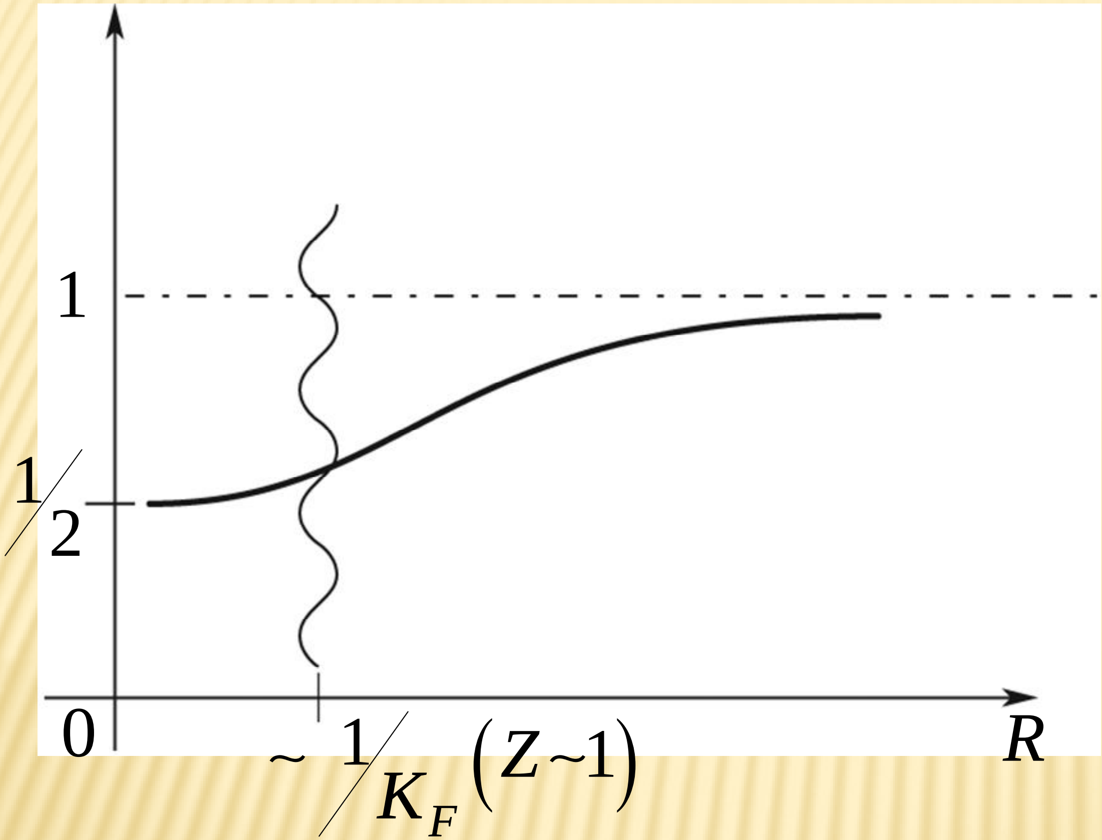
$$\frac{\mathrm{K}\left(\vec{R}\right)}{n_e^2} \underset{R\to\infty}{\longrightarrow} 1$$

2) Теперь для малых расстояний $R \sim 0$ (но $R \neq 0$ - это невозможно по физическим причинам , соответственно, $z \ll 1$

$$\left(\frac{\sin z - z\cos z}{z^3}\right)_{z \ll 1} \approx \frac{\left(\cancel{z} - \frac{z^3}{6} + \ldots\right) - z\left(\cancel{1} - \frac{z^2}{2} + \ldots\right)}{z^3} \approx \left(-\frac{1}{6} + \frac{1}{2}\right) = \frac{1}{3}$$

z^3 сокращается со знаменателем;

$$\frac{K(R)}{n_e^2} \underset{R \sim 0}{\simeq} 1 - \frac{\cancel{9}}{2} \cdot \frac{1}{\cancel{3}} = \frac{1}{2}$$



Таким образом, наблюдается уменьшение эффективной плотности электронов с такой же проекцией спина в непосредственной окрестности данного электрона – так называемая “обменная дырка”.

Плотность точно таких же электронов e^{-} в окрестности любого выделенного электрона уменьшается вдвое.